火星 CH_4 气体空间密度分布的反演

黄娅[①*]，程炳钧[①]，刘学旺[①②]，沈超[③]，张艺腾[①]，李磊[①]，张灵倩[①]

① 空间天气学国家重点实验室(中国科学院国家空间科学中心), 北京 100190;
② 中国科学院大学, 北京 100049;
③ 哈尔滨工业大学, 哈尔滨 150001;

* 联系人, E-mail: yhuang@spaceweather.ac.cn

国家自然科学基金(41231066，41174145)和空间天气学国家重点实验室专项基金资助。

摘要：目前对火星CH_4气体的探测是探索火星生命的一项重要手段，圈定出火星表面CH_4源区的位置可为将来火星生命的探索选取合适的目标点。本文在对火星CH_4气体共振散射进行探测的基础上，通过数值模拟的方法对火星CH_4气体的空间分布进行了反演。反演结果能再现模型的密度分布，辨认出CH_4气体密度分布较为稠密的区域，从而可以确定出火星表面CH_4源区的位置。

关键词：火星　CH_4　反演　CT

人类一直在试图寻找地球以外是否有生命的存在。2008年，美国“凤凰号”火星着陆器在火星表面发现冰水，找到了生命存在的条件[1]。在未来的火星探测任务中，寻找火星上是否存在或曾经存在过生命将是突破性的重大发现。

在地球上，90%的CH_4气体是生物体在消化养分的过程中释放出来的。火星大气中已经确认存在CH_4气体，但不能确认是否来自生命活动[2]。因此，火星上CH_4气体的探测成为探索火星生命的一项重要手段。

根据目前的探测结果，火星大气中CH_4的含量约为十亿分之一[3]，但该结果仅为全球性的分布情况。如果我们知道CH_4的全球空间密度分布情况，就可以找到CH4最为稠密的区域，这样就可以圈定出火星表面CH_4源区的位置，为将来探索火星生命选取合适的目标点。从而为进一步探索火星生命研究提供重要的科学依据。

在深空探测领域,利用气体分子在受到辐射后产生的共振散射特征谱线进行探测有着悠久的历史[4]。Drossart等人在对木星和土星的光谱进行研究时发现了CH_4分子荧光光谱的存在。1995年，欧空局发射了红外空间天文台太空望眼镜，该卫星首次成功对CH_4红外波段3.3μm的荧光进行了探测[5]。目前，本项目组正试图研究如何对火星CH_4气体的共振散射进行探测，本文的工作正是在此基础上展开的。

由于火星CH_4气体比较稀薄，且不会发生二次散射，因此可近似为光学薄层，探测器获得的数据是对应探测方向上所有CH_4共振散射强度的线积分，正比于相应方向上CH_4的柱密度。可以表示为，

$$P(l) = \alpha \int_l n(x)dx \tag{1}$$

其中，$P(l)$为探测器沿l方向探测得到的数据，$n(x)$为空间x处CH_4的密度，α为比例因子。

这个过程和发射式计算机断层成像ECT（Emission Computed Tomography）的投影过程一致，当卫星从不同角度对火星CH_4进行探测时，可以通过CT（Computed Tomography）方法反演出CH_4的空间分布。

本文采用数值模拟的方法，利用CT方法反演CH_4的空间密度分布，并与预设的CH_4密度模型进行比较，从而为观测方案提供理论依据。

1　CH_4模型

由于缺乏详实的观测数据，目前任何火星大气模型中都不包含CH_4，因此我们需要预设出一个CH_4分布模型。本文的模型是根据火星大气分布规律建立的，不一定和实际的CH_4空间分布完全相符。但事实上，在CT重建领域，普遍使用仿真模型来研究反演的精度。这些仿真模型一般采用和研究目标具有相近密度的材料来替代，按照研究目标的结构进行设计和加工而成，也就是说算法的有效性并不会随模型的变化而发生本质的改变。换句话说，如果将来卫星采集到的数据量和文中模拟所使用的数据量一样，那么反演结果的精度也和文中采用模型反演结果的精度一样。

我们采用MCD(Mars Climate Database)数据库中的火星大气分布数据。MCD 4.3包含从火星表面到250km以上的气象数据，包括：温度、风场、压强、辐射通量以及大气组成（尘埃、水蒸汽、含冰量）。该数据库的数据来自火星大气GCM（大气环流）模型运行的结果，与观测数据非常吻合，可以精确地给出不同位置火星大气CO_2、N_2、O、CO体积比的廓线。利用MCD先计算各经纬度上大气的总质量密度CO_2、N_2、O、CO、O_3、冰、水汽的体积比随高度的分布。其中，体积比=某种成分的疏密度/大气总数密度。在上述大气数据的基础上，作以下假设：首先假设CH_4非全球均匀分布，沿着高度方向体积比不变，均为10ppb。CH_4的体积比随经、纬度为麦克斯韦分布；其次，CH_4在大气中所占比例非常小，忽略增加CH_4而引起的大气总质量密度的变化。在这样的假设下，先由总质量密度计算出大气的总数密度，然后再按照CH_4的体积比，可得到CH_4在不同经度、纬度、高度的数密度。

根据现有的观测结果，假定CH_4分布主要集中在低纬度的区域。因此模型中CH_4分布只选取$[50S, 50N]$的范围。其次，由于卫星轨道选择晨昏面上的极轨道（见3.1节），随着火星的自转，所有经度上的反演精度都是一样的，为了减小计算量，模型中CH_4分布只选取$[0E, 120E]$，并以$(0N, 60E)$为中心。另外，随着气压降低，CH_4密度是在降低的，反演的目的也是为了获取其扩散过程，并最终反演得到气体源区，即密度分布最为稠密的区域。为了降低计算量，模型中CH_4分布的高度极限于从火星表面到150km的范围。如图1所示（取自然对数的结果），其密度的最大值在火星表面模型中心附近的$(1N, 56E)$处，密度值为$1.9 \times 10^{16} \mathrm{m}^{-3}$。

图 1　火星 CH_4 大气的分布模型

2 反演方法

严格来讲，要做精确的反演，要求对经过待反演物体的任意点的投影线必须覆盖180°的角范围（称为投影数据完备性条件）[6,7]，但通常情况都不能满足这一条件，因此无法获得准确的

反演结果。但是，反演过程中可采取一些补偿方式，通过某些先验知识来改善反演的结果，提高反演的准确性。

CT理论经过几十年的发展已经趋于成熟，并成功应用于各个领域。对于完备的投影数据，可以利用精确地反演算法，如PI线[8]、滤波反投影算法（FBP）[9]等等。如果投影数据有缺失，则通常用迭代算法来解决，如代数迭代法（ART）[10,11]、向前投影法（GP）[12,13]等。2006年，Sidky等人[14]将图像总变差（TV）极小化与迭代算法中较为广泛应用的ART算法相结合，在投影数据严重缺失的CT反演上取得了极佳的效果。卫星在观测火星CH_4气体的过程中，很难采集到完备的投影数据量，因此本文将采用该方法进行数值模拟。

2.1 ART算法

ART算法的本质是解线性方程组。当探测器在空间某一位置i对待重建物体进行探测时，每一个探测单元的探测值和被反演的区域可表示为：

$$\mathrm{p_{j,i}} = h_{\mathrm{j,i}} n \qquad (2)$$

其中，n为待反演区域体素密度值的向量，$p_{j,i}$是对第j号探测器的探测值，$h_{\mathrm{j,i}}$为相应的投影矩阵向量。联立所有位置的探测结果，可以得到：

$$P = H\,n \qquad (3)$$

ART的特点是先假设一个初始值$n^{(0)}$, 然后根据该初始值求出第一次近似值$n^{(1)}$，再根据$n^{(1)}$求出第二次近似值$n^{(2)}$, 如此继续，直到满足收敛条件为止。在根据$n^{(k-1)}$求$n^{(k)}$时，利用下面的修正公式，

$$\begin{cases} n^k = n^{k-1} \left\|H_{j,i}\right\|^2 = 0 \\ n^k = n^{k-1} + \lambda^{k-1} \dfrac{p_{j,\mathrm{i}} - H_{j,i}\, n^{k-1}}{\left\|H_{j,i}\right\|^2} H_{i,j}^T \left\|H_{j,i}\right\|^2 \neq 0 \end{cases} \qquad (4)$$

其中，λ^{k-1}为松弛因子。

2.2 TV方法

TV最早由Rudin等人提出来，用于图像去噪，后来逐渐成为一种广泛的优化准则，用于提高CT图像反演的图像质量。

将TV约束引入ART算法的过程中，也就是在投影方程的约束条件下，求解图像总变差最小的优化问题，即

$$min_{P=H\,n} \|n\|_{TV} \qquad (5)$$

其中，

$$\|n\|_{TV} = \sum_{x,y,z} |\nabla n| = \sum_{x,y,z} \sqrt{(n_{x,y,z} - n_{x-,y,z})^2 + (n_{x,y,z} - n_{x,y-1,z})^2 + (n_{x,y,z} - n_{x,y,z-1})^2}$$

通过在ART算法过程中添加先验条件（在火星CH_4气体的反演中，先验条件为：密度值非负；若某一投影射线上的值为0，则经过该射线的所有体素的密度值均为0），引入TV约束，得到投影数据不完备情况下更好的重建图像。

3 计算参数的选取

在卫星轨道和探测器的设计方面，项目组采用以下方案。

3.1 卫星轨道参数

在模拟中，CH_4气体被认为随着火星一起自转，并且在几天内其密度分布没有变化。因此火星同步轨道卫星无法观测到火星表面所有区域的CH_4。如果采用极轨道，随着火星的自转，便可以观测到所有区域的CH_4。为了简化计算，轨道形状采用圆轨道。为了方便描述卫星所运行的轨道，定义一个火星太阳坐标系（MS）：坐标原点为火星中心，X_{MS}轴指向太阳，Y_{MS}轴指向火星昏侧，Z_{MS}轴按右手规则给出。为了避免太阳光直射探测器，将卫星运行轨道设在晨昏Y_{MS}-Z_{MS}平面上。在模型中，CH_4气体分布的最大高度为169km。为了保证在轨道的任意一处，探测器的每个探测单元都可以探测到对应视线方向上所有的CH_4，卫星的轨道高度设定为500km，轨道周期1.5h。

3.2 探测器参数

模拟中，探测器的张角采用135°，这样才能保证在轨道上任意一处都可以探测到所有CH_4气体，除了被火星遮挡的区域（火星遮挡分为直接遮挡和间接遮挡。直接遮挡是：由于探测器探测到的数据是对应探测方向上所有CH_4共振散射强度的线积分。那么，一旦探测器的视线受到火星的遮挡，散射强度线积分的终点将是火星表面靠近探测器的一侧，另一侧的CH_4无法被探测到。间接遮挡是：在火星的背面，CH_4不会与太阳光产生共振散射作用，因此探测器无法探测到火星背面的CH_4）。每个探测单元的张角为3°（即探测器的水平分辨率和垂直分辨率均为50km，这是项目组目前研制的探测器所能达到的分辨率），则探测器共有45× 45个探测单元。在探测过程中，探测器的中心指向火星的中心，采样时间间隔为1.5min，采集数据的总时间为火星自转一周（约24h），因为在相对火星不动的坐标系下，卫星的轨迹以24h为周期重复运动，如图2所示。

图 2 卫星运行轨迹

4 数值模拟结果

反演的空间范围完全覆盖了模型中CH_4的分布区域，从火星表面3379.720km到3549.720km的范围。反演中，经度和纬度的网格划分均为每隔1°，高度为每10km一层，共18层, 网格的数量为$18 \times 180 \times 360$。反演的结果如图3所示。可以看出，反演出来的CH_4主要集中在纬度[50S, 50N]、经度[0E, 120E]的范围内，与原模型基本相似。

图 3 火星 CH_4 大气的反演结果

为了进一步对比反演的结果，选取纬度为0°和经度为60°这两个截面来分析。分别如图4上、下所示。其中，左列为模型，右列为反演结果。从图可进一步清楚的看出，CH_4基本上都在纬度[50S, 50N]，经度[0E, 120E]的范围内。另外，与模型一样，在相同的经纬度上密度随着高度的增加逐渐降低。但反演结果的密度偏大，特别是在离火星表面较远的地方。这主要是投影数据偏少造成的。从图2卫星运行的轨迹可以看出，卫星轨道在经度方面有较大的间隔，在赤道面高达11.25°，这导致了观测数据有较大的欠缺。另外，火星的遮挡也是导致投影数据缺失的另一个重要原因。

图 4 CH_4 密度分布在纬度为 0°（上图）和经度为 60°的截面（下图）

（左图为模型，右图为反演结果）

如果相机采样的时间间隔可以缩小，我们便可以得到更多的投影数据，反演结果的精度也会相应提高。当采样的时间间隔减小一半，即从1.5min减小到0.75min时，若用平均误差（即反演结果和原始数据差值的点平均值占原始数据点平均值的比重）来衡量反演的精度，则采样间隔为1.5min的反演误差为16.95%，而0.75min采样间隔的反演误差为15.07%。另外，如果考虑卫星的进动，同样也可以提高反演的精度。在计算中，我们简单地假设卫星每天进动3°。由于卫星的进动，在相对火星静止的坐标系中，卫星的运动轨迹不发生重合。考虑到CH_4在空间上不断的扩散，因此，采样的时间不宜太长，这里只采集了3天的数据量，轨道倾角从85°逐渐变化到94°。当采样间隔分别取1.5min和0.75min时，反演结果的平均误差分别为15.89%和14.34%。表1即为这4种反演的对比，从表中可看出采用更多数据量，更小的采样间隔，或者采用进动会使反演效果更佳。

表 1 不同参数反演的结果

参数	1	2	3	4
轨道倾角(°)	90	90	85-94	85-94
采样数据量(d)	1	1	3	3
采样间隔(min)	1.5	0.75	1.5	0.75
相机张角(°)	135	135	135	135
轨道日进(°)	0	0	3	3
平均误差(%)	16.95	15.07	15.89	14.34

5 结论和讨论

本文利用CT方法对火星CH_4气体空间分布的反演进行了数值模拟。数值模拟结果表明，当卫星运行于火星晨昏面的圆轨道时，反演的密度分布和模型基本一致，尤其是密度变化趋势是一致的。根据反演的结果，可以明显看出CH_4气体密度分布较为稠密的区域，这可以满足“圈定CH_4的源区位置，为将来探索火星生命选取合适的目标点”这一科学任务。

但是反演仍然存在一定的问题。首先，反演结果存在一定的偏差。只有增加采样的数据量（文中考虑了缩小采样的时间间隔，改变卫星轨道）才可以提高反演的精度。其次，反演结果的空间分辨率还有待于提高。反演结果的空间分辨率受控于探测器的空间分辨率，而本文是鉴于项目组目前探测器设计所能达到分辨率的基础上进行模拟的（目前，项目组所研制的探测器所能达到的最高水平分辨率和垂直分辨率均为50km，如何提高探测器的分辨率问题是项目组正在解决的难题），所以空间分辨率不高。再次，文中只考虑了稳态的情况，但现实中，火星表面的中性风会影响CH_4的空间分布，从而导致CH_4的分布随时间变化。项目组将会在下一步研究工作中进一步研究这些问题，以期达到最好的重建效果。

致谢：本文得到赵华研究员的悉心指导，特此表示感谢。对审稿人提出的修改意见表示衷心

的感谢。

参考文献

1. Kostama V - P, Kreslavsky M A, Head J W. Recent high - latitude icy mantle in the northern plains of Mars: Characteristics and ages of emplacement. Geophys Res Lett, 2006, 33(11):229-239
2. Mumma M J, Novak R E, Disanti M A, et al. A sensitive search for methane on Mars. American Astronomical Society, 2003, 35(4):937
3. ESA Press release. Mars Express confirms methane in the Martian atmosphere. ESA. Retrieved March 17, 2006
4. Fink U, Larson H P. The infrared spectra of Uranus, Neptune, and Titan from 0.8 to 2.5 microns. Astrophys J, 1979, 233:1021-1040
5. Ssart P, Fouchet T, Crovisier J, et al. Fluorescence of methane in the atmospheres of Jupiter and Saturn from ISO/SWS observations at 3.3 micron. Bulletin of the American Astronomical Society, 1998
6. Tuy H K. Inversion formula for cone-beam reconstruction. SIAM J Appl Math, 1983,43(3), 546–552
7. Li L, Chen Z Q, Xing Y X, et al. A General Exact Method for Synthesizing Parallel-beam Projections from Cone-beam Projections by filtered backprojection. Phys Med Biol, 2006, 51(21):3476 – 3479
8. Zou Y, Pan X C. Exact image reconstruction on PI-lines from minimum data in helical cone-beam CT. Phys Med Biol, 2004, 49(6): 941-960
9. Smith B D. Cone-beam tomography: recent advances and a tutorial review. Opt Eng, 1990, 29(5):524-534
10. Gordon R, Bender R, Herman G T. Algebraic Reconstruction Techniques (ART) for three-dimensional electron microscopy and X-ray photography. J Theor Biol, 1970, 29(29):471–476
11. Herman G T. Image Reconstruction from Projections. New York: Academic Press,1980
12. Gerchberg R W. Super-resolution through error energy reduction. Opt.Acta,1974, 21(9): 709–720
13. Papoulis A. A new algorithm in spectral analysis and band-limited extrapolation. IEEE Trans Circuits Syst,1975,CAS-22:735–742
14. Sidky E Y, Kao C M, Pan X. Accurate image reconstruction from few-views and limited-angle data in divergent-beam CT. J X-Ray Sci Technol,2006,14(2);119–139